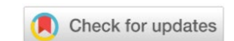
ТЕХНОСФЕРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ
TECHNOSPHERE SAFETY





УДК 517.95

Статья-перспектива

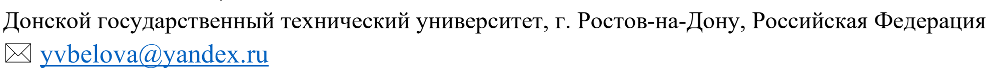
https://doi.org/10.23947/2541-9129-2024-8-3-39-48



EDN: DHTHBS

Применение методов усвоения данных наблюдений для моделирования распространения загрязняющих веществ в водоеме и управления устойчивым развитием





Ю.В. Белова ✉, **А.В. Никитина**

Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

✉ yvbelova@yandex.ru

Аннотация

Введение. Математические модели и методы повсеместно используются для исследования природных объектов, заменяя более дорогие натурные эксперименты. Одними из трудностей, возникающих при моделировании процессов в сложных системах, являются наличие входных данных и подбор параметров модели. Применение методов усвоения данных наблюдений является одним из способов оснащения математических моделей входными данными и значениями параметров. Цель настоящего исследования состоит в прогнозировании на основе методов математического моделирования развития сложных природных систем в условиях загрязнения вредными веществами. Для достижения цели были решены следующие задачи: выбран метод усвоения данных наблюдений, актуализирована математическая модель биологической кинетики, данная модель скомплексирована с моделью гидродинамики, разработан программный комплекс. Актуальность работы заключается в применении нового подхода к реализации модели динамики фитопланктонных популяций (эвтрофикации) Азовского моря при наличии загрязняющих примесей, основанного на применении вариационных методов усвоения данных, полученных в ходе экспедиционных исследований.

Материалы и методы. Распространение загрязняющих веществ моделируется на основе трехмерной математической модели, основанной на системе уравнений конвекции — диффузии — реакции. На входе модели подается вектор движения водной среды. Составляющие вектора скорости течений в прибрежной системе рассчитываются на основе математической модели гидродинамики, базирующейся на трех уравнениях движения и уравнении неразрывности. Разработанный на основе описанных моделей программный комплекс получает на входе натурные данные, собранные в ходе экспедиционных исследований, и позволяет уточнять модель загрязнения водной среды и биоты благодаря применению вариационных методов усвоения данных.

Результаты исследования. Построен краткосрочный прогноз распространения загрязняющих веществ на выходе из Таганрогского залива. Проведенный вычислительный эксперимент отражает динамику распространения загрязняющих веществ от источников заражения на временном интервале от 3 до 12 дней.

Обсуждение и заключение. Рассмотренные в данном исследовании вариационные методы усвоения данных наблюдений позволяют уточнять и дополнять математические модели динамики фитопланктонных популяций и распространения загрязняющих веществ. Программное обеспечение, основанное на описанных в данной работе математических моделях, дает возможность строить кратко- и среднесрочные прогнозы распространения вредных примесей, оценивать их влияние на развитие основных видов фитопланктонных популяций в Азовском море и определять стратегии управления устойчивым развитием.

Ключевые слова: модель эвтрофикации, модель гидродинамики, вариационные методы, опасные явления, усвоение данных наблюдений

Благодарности. Авторы благодарят редакционную команду журнала и анонимных рецензентов за высказанные замечания, которые позволили повысить качество статьи, а также выражают признательность руководителю проекта, члену-корреспонденту РАН Александру Ивановичу Сухинову.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22–11–00295, https://rscf.ru/project/22-11-00295/

Для цитирования. Белова Ю.В., Никитина А.В. Применение методов усвоения данных наблюдений для моделирования распространения загрязняющих веществ в водоеме и управления устойчивым развитием. *Безопасность техногенных и природных систем.* 2024;8(3):39–48. https://doi.org/10.23947/2541-9129-2024-8-3-39-48

Perspective Article

Application of Methods of Observational Data Assimilation to Model the Spread of Pollutants in a Reservoir and Manage Sustainable Development

Yuliya V. Belova ✉, **Alla V. Nikitina**
Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation
✉ yvbelova@yandex.ru

Abstract
Introduction. Mathematical models and methods are widely used to study natural phenomena, replacing more expensive field experiments. However, one of the main challenges in modeling processes in complex systems is the lack of available input data and difficulty in selecting model parameters. The use of observational data assimilation methods is one of the ways to provide mathematical models with input data and parameter values. The aim of this study was to predict the development of complex natural systems under conditions of pollution using mathematical modeling techniques. To achieve this, several tasks were completed: a method for assimilating observational data was selected, a mathematical model for biological kinetics was updated, it was integrated with a hydrodynamic model, and a software package was developed. The significance of the work lies in the to the implementation of a model of the dynamics of phytoplankton populations (eutrophication) of the Azov Sea in the presence of pollutants, based on the use of variational methods for assimilating data obtained during expeditionary research.
Materials and Methods. The spread of pollutants was modeled using a three-dimensional mathematical model based on a system of convection — diffusion — reaction equations. The vector of movement of the aquatic environment was the input data for the model. The components of the current velocity vector in the coastal system were calculated using a mathematical model of hydrodynamics, based on three equations of motion and the equation of continuity. The software package developed based on these models received full-scale data collected during expeditionary research as input, and allowed us to refine the model of pollution in the aquatic environment and biota using variational methods for data assimilation.
Results. A short-term forecast for the spread of pollutants at the outlet of the Taganrog Bay was developed. The conducted computational experiment reflected the dynamics of pollutant spread from sources of contamination over a period of 3 to 12 days.
Discussion and Conclusion. The variational methods of assimilating observational data discussed in this study allow for the refinement and supplementation of mathematical models of phytoplankton population dynamics and pollutant spread. The software based on these mathematical models enables the creation of short- and medium-term forecasts for the spread of harmful substances, assessment of their impact on the growth of major phytoplankton species in the Azov Sea, and determination of strategies for sustainable development management.

Keywords: eutrophication model, hydrodynamics model, variational methods, dangerous phenomena, assimilation of observational data

Acknowledgements. The authors would like to thank the Editorial team of the Journal and anonymous reviewers for their competent expertise and valuable recommendations for improving the quality of the article. The authors also express their gratitude to the project leader, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, Aleksandr I. Sukhinov.

Funding Information. The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22–11–00295, https://rscf.ru/en/project/22-11-00295/

For citation. Belova YuV, Nikitina AV. Application of Methods of Observational Data Assimilation to Model the Spread of Pollutants in a Reservoir and Manage Sustainable Development. *Safety of Technogenic and Natural Systems.* 2024;8(3):39–48. https://doi.org/10.23947/2541-9129-2024-8-3-39-48

Введение. Математические модели и методы уже несколько десятилетий успешно применяются для проведения исследований в различных сферах науки и инженерии. Математическое моделирование предоставляет быстрый, удобный и относительно недорогой инструментарий для изучения и прогнозирования процессов, протекающих в сложных, по сравнению с экспедициями и натурными экспериментами, природных системах, и применяет-

ся для решения многих научных и практических задач. Так, например, могут быть решены задачи прогностического моделирования заиления судоходных путей, что важно для безопасного судоходства, а также предсказания последствий чрезвычайных ситуаций и катастроф техногенного характера. Примером может служить сильный шторм 11 ноября 2007 года в азово-черноморском бассейне, в результате которого более 20 судов потерпели крушение, а район Керченского пролива стал местом экологической катастрофы. В воду попало несколько тонн мазута и серы, в результате чего произошло заражение береговой линии и седиментного слоя соединениями нефтепродуктов, последствия его наблюдались еще несколько лет. Другой пример неблагоприятных процессов — транспорт донных материалов из устья реки Дон в Таганрогский залив, что влияет на ареалы гидробионтов, способствует интенсивной эвтрофикации и приводит к размножению комара-звонца (Chironomidae Newman).

Согласно Постановлению Правительства РФ № 2451 от 31.12.2020 г.[1], всего лишь четыре часа с момента обнаружения или с момента поступления информации о разливе в водоеме есть у исследователей, ответственных лиц, принимающих решения, а также представителей водоохранных служб для расчета изменения концентрации нефти и нефтепродуктов и их локализации. Согласно приведенному и другим нормативным документам, принятым Правительством РФ, ответственные лица и структуры должны принять решение и произвести действия по устранению опасной экологической ситуации природного и техногенного характера в течение нескольких часов-суток. Исходя из этого время построения прогнозов и сценариев развития чрезвычайной ситуации (ЧС) ограничено. Это требование определяет актуальность разработки комплекса математических моделей гидродинамики и гидробиологии, которые учитывали бы особенности прибрежных систем (воздействие ветров на структуру течений, силу Кориолиса, сложную геометрию расчетной области, турбулентный обмен, испарение, сгонно-нагонные явления, стоки рек и др.) и позволяли получать прогнозы за минимальное время.

При построении прогнозов развития природных систем и попытке описать реальное физическое явление средствами математического моделирования зачастую только лишь построения функции состояния моделей процессов недостаточно. Повысить точность решения позволяет использование для математических моделей сопряженных задач, а также алгоритмов, базирующихся на вариационных принципах. Эти принципы позволяют установить связь модели с натурными данными [1]. Такая методология является эффективной при решении прикладных, в том числе и вычислительно трудоемких задач, например вариационных и оптимизационных задач математической и ядерной физики [2]. Г.И. Марчуком и его последователями применялись сопряженные уравнения [3], что позволило повысить эффективность решения задач аэро- и гидрофизики для атмосферы и глубоководных водоемов, а также была усовершенствована теория построения сопряженных операторов для линейных и нелинейных моделей [4].

Вариационный подход к решению объединенных прямых и сопряженных задач с использованием методов усвоения позволил улучшить связь между математическими моделями и натурными данными. Методы усвоения данных, которые развиваются с 1960-х годов, основаны на построении обратных и оптимизационных задач с использованием двух подходов: классического вариационного принципа Лагранжа с применением сопряженных задач [4] и оптимизационных методов типа взвешенных наименьших квадратов [5].

Усвоение данных наблюдений является инструментарием, который позволяет существенно повысить точность прогностического моделирования природных процессов, он давно и успешно применяется ученым сообществом [6]. Здесь актуальной задачей становится разработка новых методов, которые позволили бы существенно сократить время расчетов.

Материалы и методы. При построении моделей прогнозирования природных явлений и процессов одними из основных проблем являются вопросы соответствия решения, полученного с использованием математической модели, реальному процессу, протекающему в природной системе, и уменьшения процента неопределенностей.

При построении математических моделей гидродинамических и гидробиологических процессов требуется информация о начальных условиях и параметрах модели, которая может быть получена с помощью данных наблюдений. Таким образом, при построении прогностических сценариев протекания ЧС природного или техногенного характера очень важно оценить адекватность самой математической модели. Следующий этап моделирования включает в себя проверку корректности, устойчивости поставленной задачи. Исследование математической модели на непрерывном уровне предполагает исследование влияния входных данных на решение модельной задачи. Возмущение правых частей используемого уравнения или системы уравнений в частных производных в рассматриваемой задаче Коши позволяет при известных операторах исследовать свойства построенной математической модели. Исследование стационарных и особых точек непрерывной функции или нескольких функций — решений поставленной задачи, например концентрации одного или нескольких загрязняющих водную среду веществ, позволяет разработать сценарии, от пессимистичного до оптимистичного режимов, с целью разработки мер эффективного управления сложной водной экосистемой.

[1] *Об утверждении Правил организации мероприятий по предупреждению и ликвидации разливов нефти и нефтепродуктов на территории Российской Федерации, за исключением внутренних морских вод Российской Федерации и территориального моря Российской Федерации.* Постановление Правительства РФ № 2451 от 31.12.2020 г. URL: https://docs.cntd.ru/document/573319208 (дата обращения: 21.05.2024).

Впервые для анализа натурных данных был применен метод полиномиальной интерполяции данных постоянно пополняемой базы экологических замеров в двумерном случае. Для наблюдений были определены области влияния. При реализации алгоритма для расчета в текущий момент background — данные ранее полученного прогноза — использовались как входная информация.

Методология решения задач усвоения данных вышла на новый уровень с появлением метода OI (Optimal Interpolation), или метода статистической интерполяции.

Следующий этап развития рассматриваемых методов связан с развитием и реализацией вариационных методов, включая теорию оптимального управления. Эти методы базируются на минимизации функционала, построенного специальным образом, с помощью которого устанавливается связь между решениями и наблюдениями (натурными замерами, экспедиционными данными, базами геоинформационных систем ГИС).

Данная теория и методы широко используются при реализации задач метеорологии [5] и динамической океанографии [7]. В процессе минимизации построенного функционала необходимо вычислять его градиент, для чего успешно применяются сопряженные уравнения, что описано в работах [8, 9].

Модель динамики фитопланктонных популяций. Математическая модель динамики фитопланктонных популяций описывает процесс активного роста микроводорослей при наличии достаточного количества биогенных элементов. Если развитие фитопланктонных популяций становится слишком интенсивным, говорят о процессе эвтрофикации. Причины эвтрофикации могут иметь как природный (климатические изменения), так и антропогенный характер (поступление в водоем значительного количества биогенных веществ со стоками рек). В системе C_i — значения концентрации i-ой субстанции [10, 11]:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t}+\frac{\partial\left(uC_k\right)}{\partial x}+\frac{\partial\left(vC_k\right)}{\partial y}+\frac{\partial\left(\left(w+w_{C,k}\right)C_k\right)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_k\frac{\partial C_k}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu_k\frac{\partial C_k}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\nu_k\frac{\partial C_k}{\partial z}\right)+\psi_k, \quad (1)$$

где $\mathbf{u}=\{u, v, w\}$ — вектор скорости среды (водного потока); $w_{C,k}$ — гравитационное осаждение k-ой компоненты, если она находится во взвешенном состоянии; μ_k, ν_k — горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена для k-ой компоненты; ψ_k — химико-биологический источник (сток) или член, описывающий агрегирование (слипание-разлипание), если соответствующая компонента является взвесью, индекс k указывает на вид субстанции, $k=\overline{1,15}$:

1 — сероводород (H_2S);
2 — элементная сера S;
3 — тиосульфаты (и сульфиты);
4 — сульфаты (SO_4);
5 — общий органический азот (N);
6 — аммоний (NH_4 — аммонийный азот);
7 — нитраты (NO_3);
8 — нитриты (NO_2);
9 — фитопланктон;
10 — зоопланктон;
11 — силикаты (SiO_3 — метасиликат; SiO_4 — ортосиликат);
12 — растворенный кислород (O_2);
13 — железо (Fe^{2+});
14 — фосфаты (PO_4);
15 — кремнекислота (H_2SiO_4, H_2SiO_3 — ортокремневая и метакремневая кислоты соответственно);
16 — микропластик.

Система (1) содержит уравнения, которые можно отнести к типу конвекции — диффузии — реакции. В качестве расчетной области рассмотрим замкнутый бассейн G. Невозмущенная поверхность водоема Σ_0 ограничивает сверху G, $\Sigma_b=\Sigma_b(x, y)$ — донная поверхность снизу. σ — цилиндрическая поверхность, ограничивает G сбоку. Введем обозначение: $\Sigma=\Sigma_0\cup\sigma\cup\Sigma_b$ — кусочно-гладкая граница области $\bar{G}$, временной интервал $0<t\le T_0$. Полагаем, что $\mathbf{n}$ и $\mathbf{u_n}$ — вектор внешней нормали и нормальная составляющая $\mathbf{u}$ к поверхности Σ.

Считаем, что начальные условия для системы (1) выглядят следующим образом: $C_k|_{t=0}=C_{k0}(x, y, z)$, $k=\overline{1,15}$.

Скомплексируем (1) со следующими комбинированными граничными условиями: на σ: если $\mathbf{u_n}<0$, то $C_k=0$; если $\mathbf{u_n}\ge 0$, то $\frac{\partial C_k}{\partial \mathbf{n}}=0$; на Σ_0: $\frac{\partial C_k}{\partial z}=g\left(C_k\right)$; на дне Σ_b: $\frac{\partial C_k}{\partial z}=-\varepsilon_k C_k$, $k=\overline{1,16}$, определим ε_k как коэффициент поглощения k-ой примеси донными отложениями.

При безветрии, особенно в летний период, в придонных слоях мелководных водоемов, таких как, например, Азовское море, Таганрогский залив, Геленджикская бухта, могут возникнуть практически анаэробные условия. Восстановление водонасыщенного поверхностного ила влечет за собой высвобождение в раствор железа, фосфатов, сульфатов, марганца, аммония и силикатов, а также органических соединений. Скомплексированные модели вида (1) (разработанная авторским коллективом и модель гидродинамики [12]) используются для изучения механизмов окисления и восстановления марганца, ассимиляции NH_4, нитрификации, нитратредукции (денитрификации), аммонификации, окисления H_2S, сульфатредукции и др. Эксперименты с моделью (1) дают возможность изучать биогенный и кислородный режимы прибрежной системы, анализировать механизм формирования вследствие антропогенной эвтрофикации заморных явлений рыб и других гидробионтов.

Вариационный подход для пространственно-трёхмерной математической модели эвтрофикации вод. Запишем математическую модель (1) для расчетной области (Азовское море) в виде операторного уравнения:

$$L(C,\mathbf{Y}) \equiv D\frac{\partial C}{\partial t} + J(C,\mathbf{Y}) - \boldsymbol{\psi} - \mathbf{r} = 0, \tag{2}$$

определим $\mathbf{C}$ как вектор-функцию состояния изучаемой водной экосистемы $\mathbf{C} = \left\{C_k(\mathbf{x},t), k=\overline{1,16}\right\}$, $\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{x},t) \in Q(\text{Ц}_t)$, $Ц_t = G\times(0,T_0)$, $(\mathbf{x},t)\in Ц_t$; $J(\mathbf{S},\mathbf{Y})$ — дифференциальный нелинейный пространственный оператор; D — диагональная матрица; $\boldsymbol{\psi} = \left\{\psi_k(\mathbf{x},t), k=\overline{1,16}\right\}$ — вектор, компонентами которого являются функции источников; $\mathbf{r} = \left\{r_k(\mathbf{x},t), k=\overline{1,16}\right\}$ — вектор, компоненты которого содержат функции неопределенностей и ошибок математической модели (1) с начальными и граничными условиями. Зависимости (модели наблюдений), коэффициенты и параметры $w_{C,k}$, μ_k, u, v, w, v_k входные данные начальных и краевых условий для модели (2), $k=\overline{1,16}$; внутренние параметры операторов включаются в $\mathbf{Y}\in R(\text{Ц}_t)$.

Пусть $t = 0$, тогда начальные условия для (2) будут иметь вид:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_a^0 + \xi,\ \mathbf{Y} = \mathbf{Y}_a^0 + \zeta, \tag{3}$$

где $\mathbf{C}_a^0$ и $\mathbf{Y}_a^0$ — априорные оценки вектор-функции состояния и вектора параметров соответственно; функции неопределенностей обозначены с помощью ξ и ζ.

Рассмотрим интегральное тождество:

$$I(\mathbf{C},\mathbf{Y},\mathbf{C}^*) \equiv \int_{\text{Ц}_t} \left(L(\mathbf{C},\mathbf{Y}),\mathbf{C}^*\right) dGdt = 0, \tag{4}$$

здесь $\mathbf{C}^*$ — это функции, сопряженные к $\mathbf{C}(\mathbf{C}^* \in Q^*(\text{Ц}_t))$. (4) представляет собой вариационную постановку модельной задачи (2), (3), или функционал энергетического типа. Перепишем (4) в следующем виде:

$$I(\mathbf{C},\mathbf{Y},\mathbf{C}^*) \equiv \sum_{k=1}^{16}\left\{\left(\Lambda\mathbf{C},\mathbf{C}^*\right)_k - \int_{Ц_t}(\psi_k + r_k)\mathbf{C}_k^* dGdt\right\} = 0. \tag{5}$$

Операторы турбулентного обмена и переноса входят в слагаемые ($\Lambda\mathbf{C}$, $\mathbf{C}^*$).

Модель гидродинамики [12] будем считать моделью процесса. В моделях гидробиологии параметризацию параметров и в результате полученные функциональные зависимости, например, для описания продукционно-деструкционных процессов или роста фито- или зоопланктона будем считать подмоделями, или моделями наблюдений. Определим зависимость между замерами и функциями состояния:

$$\boldsymbol{\varphi}_m = \left[\mathbf{W}(\mathbf{C})\right]_m + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x},t), \tag{6}$$

где $[\mathbf{W}(\mathbf{C})]_m$ — вектор подмоделей (моделей наблюдений); $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t)$ — вектор ошибок и неопределенностей; $\boldsymbol{\varphi}_m$ — величины, за которыми осуществляем наблюдение.

Определим $\boldsymbol{\varphi}_m$ на $\text{Ц}_t^m \in \text{Ц}_t$. В (6) операция переноса информации с Ц_t на Ц_t^m обозначена квадратными скобками.

Расширим систему моделирования данными натурных замеров (считаем их близкими к точным), при этом функционал «качества» будет иметь следующий вид:

$$\Phi_0(\mathbf{C}) = \left\{\left(\boldsymbol{\varphi}_m - \left[\mathbf{W}(\mathbf{C})\right]_m\right)^\tau M\chi_0\left(\boldsymbol{\varphi}_m - \left[\mathbf{W}(\mathbf{C})\right]_m\right)\right\}_{\text{Ц}_t^m} \equiv \left(\boldsymbol{\eta}^\tau C_1\boldsymbol{\eta}\right), \tag{7}$$

определим χ_0 как весовую функцию для определения конфигурации носителя наблюдений Ц_t^m в Ц_t и интегралы по области Ц_t, представляющие собой меру для (7) в виде $C_1 = M\chi_0(\mathbf{x}, t)$, где M — весовая матрица.

Рассмотрим функционалы, представляющие собой обобщенные характеристики поведения гидробиогеоценоза:

$$\varPhi_k\left(\mathbf{C}\right)=\int\limits_{Ц_t} F_k\left(\mathbf{C}\right)\chi_k\left(\mathbf{x},t\right)dGdt\equiv\left(F_k,\chi_k\right),\ \chi_k\subset Q^*\left(Ц_t\right),\ k=\overline{1,K}.$$

$F_k(\mathbf{C})$ — ограниченные и дифференцируемые относительно $\mathbf{C}\in Q(Ц_t)$ функции, которые будем оценивать.

Определим функционал для минимизации неопределенностей:

$$\tilde{\varPhi}_k^h\left(\mathbf{C}\right)=\varPhi_k^h\left(\mathbf{C}\right)+\left\{\left(\boldsymbol{\eta}^\tau C_1\boldsymbol{\eta}\right)^h_{Ц_t^m}+\left(\mathbf{r}^\tau C_2\mathbf{r}\right)^h_{Ц_t^m}+\left(\left(\mathbf{C}^0-\mathbf{C}_a^0\right)^\tau C_3\left(\mathbf{C}^0-\mathbf{C}_a^0\right)\right)^h_{Ц_t^m}+\right.$$
$$\left.+\left(\left(\mathbf{Y}^0-\mathbf{Y}_a^0\right)^\tau C_4\left(\mathbf{Y}^0-\mathbf{Y}_a^0\right)\right)^h_{R^h\left(Ц_t^m\right)}\right\}/2+I^h\left(\mathbf{C},\mathbf{Y},\mathbf{C}^*\right),k\ge1. \tag{8}$$

Считаем, что C_i — весовые матрицы, $i=\overline{1,4}$. Рассмотрим систему:

$$\frac{\partial\tilde{\varPhi}_k^h}{\partial\mathbf{C}^*}\equiv D\Lambda_t\mathbf{C}+J^h\left(\mathbf{C},\mathbf{Y}\right)-\boldsymbol{\psi}-\mathbf{r}=0; \tag{9}$$

$$\frac{\partial\tilde{\varPhi}_k^h}{\partial\mathbf{C}}\equiv\left(D\Lambda_t\right)^\tau\mathbf{C}_k^*+A^\tau\left(\mathbf{C},\mathbf{Y}\right)\mathbf{C}_k^*+\mathbf{d}_k=0;$$

$$\mathbf{C}_k^*\left(\mathbf{x}\right)\Big|_{t=T_0}=0;\ \mathbf{d}_k=\frac{\partial}{\partial\mathbf{C}}\left(\tilde{\varPhi}_k^h\left(\mathbf{C}\right)+0{,}5\left(\boldsymbol{\eta}^\tau C_1\boldsymbol{\eta}\right)\right);$$

$$\mathbf{C}^0=\mathbf{C}_a^0+C_3^{-1}\mathbf{C}_k^*\left(0\right),\ t=0;\ \mathbf{r}\left(\mathbf{x},t\right)=C_2^{-1}\mathbf{C}_k^*\left(\mathbf{x},t\right);$$

$$\mathbf{Y}=\mathbf{Y}_a+C_4^{-1}\varGamma_k;\ \varGamma_k=\frac{\partial}{\partial\mathbf{Y}}I^h\left(\mathbf{C},\mathbf{Y},\mathbf{C}_k^*\right);$$

$$A\left(\mathbf{C},\mathbf{Y}\right)\mathbf{C}'=\frac{\partial}{\partial\alpha}\left\{J^h\left(\mathbf{C}+\alpha\mathbf{C}',\mathbf{Y}\right)\right\}\Big|_{\alpha=0},\ k\ge1.$$

$A^\tau(\mathbf{C}',\mathbf{Y})$, Λ_t определим как операторов сопряженной задачи и производных или их дискретных аппроксимаций по времени; $\boldsymbol{\Gamma}_k$ — функции чувствительности моделей к изменению параметров; $\mathbf{C}'\equiv\delta\mathbf{C}$; α — заданное число.

Рассмотрим алгоритмы усвоения данных последовательных наблюдений, поступающих из различных наблюдательных средств в систему моделирования в режиме реального времени. Для этого воспользуемся методами расщепления и декомпозиции:

$$Ц_t^h=\sum_{n=1}^{N_t-1}Ц_{tn}^h;\ Ц_{tn}^h=G^h\times\left[t_{n-1},t_n\right];\ \tilde{\varPhi}^h\left(\mathbf{C},\mathbf{C}^*,\mathbf{Y},\boldsymbol{\varphi}\right)=\sum_{n=1}^{N_t-1}\sum_{l=1}^{p}\tilde{\varPhi}_{nl}^h, \tag{10}$$

здесь $\tilde{\varPhi}_{nl}^h$ — часть функционала (9) для $[t_{n-1}, t_n]$ на l-м этапе расщепления, $n=\overline{1,N_t}$, p определим как общее число этапов расщепления. Дискретизацию проведем на основе аддитивно-усредненных схем расщепления. Будем использовать алгоритм для нахождения решения в области $Ц_t^h$ с регулярной равномерной временной сеткой $\overline{\omega}_t^h\equiv\left\{t_n,n=\overline{0,N_t}\right\}$. Для исследований будем использовать структуру с фазовыми пространствами:

$$\left\{\mathbf{C}_l^n,\ \mathbf{C}_l^{*n},\ \mathbf{r}_l^n,l=\overline{1,p}\right\}=\bigcup_{l=1}^{p}Q_l^h\left(Ц_t^h\right)\subset Q^h\left(Ц_t^h\right).$$

Метод решения поставленной задачи. Для решения (9) считаем, что $n=\overline{1,N_t}$. Опишем пошагово алгоритм используемого метода.

1. Перейти на подсеточную структуру декомпозиции, при этом $t=t_{n-1}$:

$$\left\{\mathbf{C}^{n-1}\in Q^h\left(Ц_t^h\right)\right\},\ \bigcup_{l=1}^{p}\left\{\mathbf{C}_l^{n-1}\in Q_l^h\left(Ц_t^h\right)\right\},\ \mathbf{C}_l^{n-1}=\mathbf{C}^{n-1}.$$

2. В подсеточной структуре получить решения прямых и сопряженных задач:

$$\varLambda_l^n\mathbf{C}_l^n-\boldsymbol{\psi}_l^n-\mathbf{r}_l^n=0,\ l=\overline{1,p},\ p\ge1.$$

$$\varLambda_l^{*n}\mathbf{C}_l^{*n}=\left[\frac{\partial\varPhi_{kl}\left(\mathbf{C}\right)}{\partial\mathbf{C}}+U^\tau C_1\left(\boldsymbol{\varphi}_m-\left[\mathbf{W}\left(\mathbf{C}\right)\right]_m\right)\right]_l^{n-1},$$

$$\mathbf{C}_l^{*n+1}=0,\ \mathbf{r}_l^n=\left(C_2^n\right)^{-1}\mathbf{C}_l^{*n},\ t_n\le t\le t_n.$$

В функции $\boldsymbol{\psi}_l^n$ входят $\mathbf{C}_l^{n-1}$. $\mathbf{r}_l^n$ учитывают все неопределенности на шаге $[t_{n-1}, t_n]$.

3. Возврат в основную структуру $Q^h\left(\text{Ц}_t^h\right)$ при $t = t_n$:

$$\bigcup_{l=1}^{p}\left\{\mathbf{C}_l^n \in Q_l^h\left(\text{Ц}_t^h\right)\right\} \Rightarrow \left\{\mathbf{C}^n \in Q^h\left(\text{Ц}_t^h\right)\right\},\ \ \mathbf{C}^n = \frac{1}{p}\sum_{l=1}^{p}\mathbf{C}_l^n .$$

Считаем, что последний этап расщепления можно реализовать по формуле:

$$\Lambda_{pn}\mathbf{C}^n - \boldsymbol{\psi}_p^n - \mathbf{r}_p^n = 0\,, \tag{11}$$

здесь $\Lambda_{pn}\mathbf{C}^n$ — оператор аппроксимации часть модели на p-м этапе; $\boldsymbol{\psi}_p^n$ — функции источников; $\mathbf{r}_p^n$ — функция неопределенностей модели (2) и вносимых в дискретную модель расщеплений на шаге. Считаем, что матрицы весов C_{1n} и C_{2n} известны.

Рассмотрим следующую задачу:

$$\Lambda_{pn}^*\mathbf{C}^{*n} = \alpha_{1n}C_{1n}\left(\boldsymbol{\varphi}^{n-1} - \mathbf{C}^{n-1}\right); \tag{12}$$

$$\mathbf{r}_p^n = \left(C_{2n}^{-1}/\alpha_{2n}\right)\mathbf{C}^{*n}. \tag{13}$$

Для решения будем использовать следующий метод, алгоритм которого опишем пошагово:

1. Рассчитать по (12) $\mathbf{C}^{*n}$.
2. Найти $\mathbf{r}_p^n$, пользуясь (13).
3. Рассчитать $\mathbf{C}^n$, используя формулу (11).

Возникающую в процессе реализации алгоритма метода СЛАУ будем решать методом прогонки.

Рассмотрим преобразованный алгоритм:

$$\Lambda_{pn}^*\mathbf{C}^{*n} = \alpha_{1n}C_{1n}\left(\boldsymbol{\varphi}^n - \mathbf{C}^n\right), \tag{14}$$

$$\Lambda_{pn}\mathbf{C}^n - \boldsymbol{\psi}^n - \left(C_{2n}^{-1}/\alpha_{2n}\right)\mathbf{C}^{*n} = 0\,. \tag{15}$$

Систему решим методом прогонки. Для рассмотренных модификаций устойчивость схем расщепления обеспечивает устойчивость используемых схем усвоения данных. Если в (8) $\mathbf{C}^* = const$, то оно дает балансовое соотношение первого порядка. В случае, если $\mathbf{C}^* = \mathbf{C}$, то получаем уравнение баланса энергии анализируемой системы.

Выпишем функционал качества для новой последующей модификации:

$$\Phi_{0n}\left(\mathbf{C}\right) = 0,5\left[\alpha_1\left(\boldsymbol{\eta}_n^{\tau}W_{1n}\boldsymbol{\eta}_n\right) + \alpha_2\left(\mathbf{r}_n^{\tau}W_{2n}\mathbf{r}_n\right)\right], \tag{16}$$

$$\mathbf{r}_n = \Lambda_{pn}\mathbf{C}_n - \boldsymbol{\psi}_n;\ \boldsymbol{\eta}_n = \boldsymbol{\varphi}_n - \mathbf{C}_n;\ \alpha_1 + \alpha_2 = 1,\ \alpha_1, \alpha_2 > 0. \tag{17}$$

Найдем минимум функционала относительно функции $\mathbf{C}^n$:

$$\Lambda_{pn}^*C_{1n}\left(\Lambda_{pn}\mathbf{C}^n - \boldsymbol{\Psi}^n\right) + \frac{\alpha_{1n}}{\alpha_{2n}}C_{2n}\left(\mathbf{C}^n - \boldsymbol{\varphi}^n\right) = 0\,. \tag{18}$$

Получим однозначно разрешимую систему с пятидиагональной матрицей. Решим полученную СЛАУ методом прогонки.

Новый класс методов усвоения в реальном времени включает в себя схему аддитивного последовательного усвоения. Построенные модификации ввиду большого объема вычислительной работы ориентированы на супервычислительные системы, включая кластерные системы и графические ускорители.

Замеры $\boldsymbol{\varphi}_m$ применяются в виде карт и цифровых изображений. Такое представление дает значительную плотность данных в области Ц_t, замеры представляют собой информационные поля. Планирование наблюдений базируется на значениях функции неопределенностей. Там, где они большие, планируется проводить дополнительные натурные замеры или наблюдения.

Результаты исследования. Для решения задачи моделирования эвтрофикации вод Азовского моря (1) разработан комплекс параллельных программ, включающий в себя:

– модуль гидродинамических процессов, рассчитывающий поле течений водного потока на основе математической модели для мелководного водоема [12];

– модуль распространения загрязнений в водной среде и изменения концентрации основных гидробионтов (1), позволяющий оценить влияние загрязняющих веществ на биологическую продуктивность акватории;

– карту глубин Азовского моря для построения расчетных сеток для численной реализации разработанных алгоритмов;

– базу экспедиционных данных, позволяющую уточнять модель загрязнения водной среды и распространения биоты благодаря применению описанных выше методов усвоения данных.

На основе разработанного ПО проведен численный эксперимент. Вектор скорости водного потока рассчитывается с помощью модели гидродинамики при восточном ветре, скорость которого составляет 5 м/с, и подается на вход для расчета движения загрязнений, содержащих микропластиковые частицы, на основе уравнений конвекции-диффузии. На рис. 1 *а* представлены результаты численного эксперимента по расчету полей течений водного потока при указанных метеорологических условиях, на котором можно наблюдать вихревые структуры течений в районе кос, в северо-восточной части моря, в Таганрогском заливе. Градиент цвета на рис. 1 *а* отражает распределение скоростей водного потока, максимальное значение — 4,822 м/с. На рисунках 1 *б, в, г* представлены результаты расчета для модельной ситуации распространения заражения водной среды микропластиковыми частицами, попадающими в Азовское море со стоками рек Дон и Кубань, а также когда источник загрязнения опасными веществами, в том числе микропластиком, находится на выходе из Таганрогского залива. Представлен краткосрочный прогноз распространения загрязняющих веществ через 3, 6, 12 суток с момента заражения. Начальная концентрация загрязняющего вещества составила 5 мг/л, через 3 суток максимальная концентрация на выходе из Таганрогского залива составила 1,363 мг/л, через 6 суток — 0,83 мг/л, через 12 суток — 0,336 мг/л.

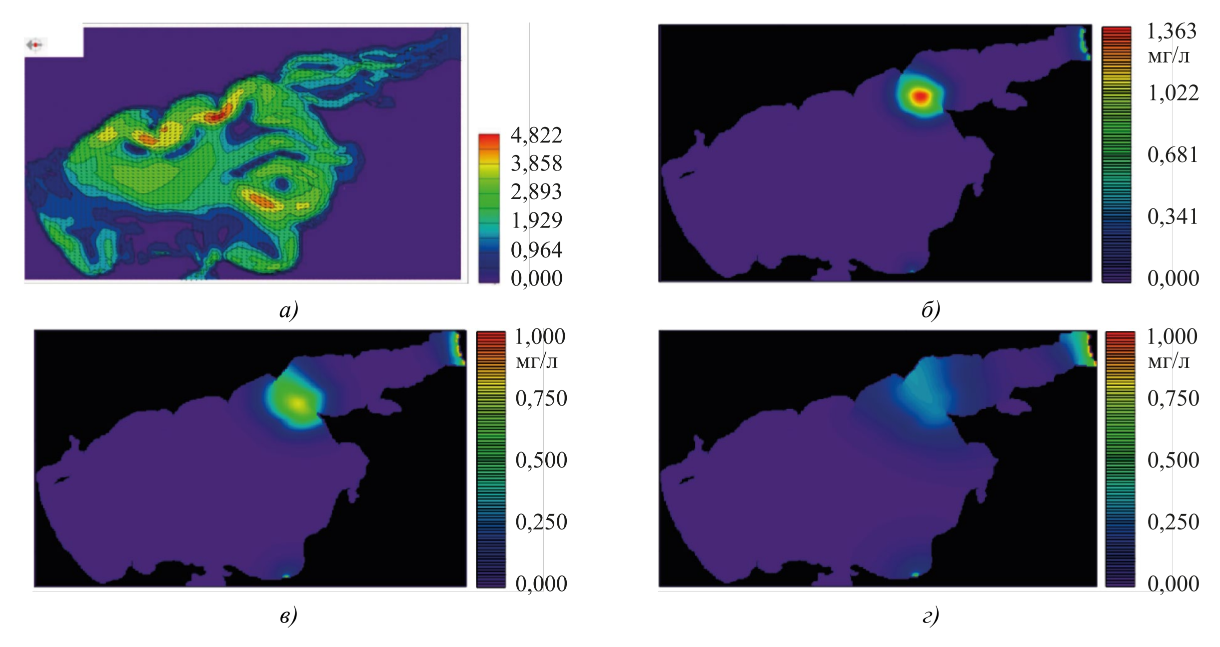


Рис. 1. Картина течений в Азовском море и распространение загрязняющих веществ, временной интервал: *а* — начальная концентрация; *б* — 3 суток; *в* — 6 суток; *г* — 12 суток

Обсуждение и заключение. Вычислительный эксперимент демонстрирует, что несмотря на восточный ветер, вихревые структуры течений захватили загрязняющие вещества и переместили их в Таганрогский залив. Устойчивые вихри потенциально могут захватывать и удерживать частицы микропластика, попадающие в море со стоками рек, а также способствовать накоплению загрязнений в придонном слое в результате биообрастания микропастиковых частиц и их затопления.

Как отмечалось выше, при построении математических моделей для прогнозирования природных явлений и процессов одной из основных проблем является проверка их адекватности путем анализа полученных на их основе результатов на соответствие поведению изучаемой природной системы. При построении математических моделей гидродинамических и гидробиологических процессов требуется информация о начальных условиях и параметрах (входных данных), которая может быть получена с помощью наблюдений. Таким образом, при построении прогностических сценариев необходимо не только оценивать качество построенной математической модели, но и усваивать данные наблюдений, исследовать чувствительность построенных моделей к изменениям входных данных.

В работе представлен подход к реализации модели динамики фитопланктонных популяций (эвтрофикации) Азовского моря с применением вариационных методов усвоения данных, полученных в ходе экспедиционных исследований. Разработанный программный комплекс использует материалы экспедиционных работ, постоянно пополняемые базы экологических данных, ГИС и позволяет уточнять модель загрязнения водной среды и распространения гидробионтов благодаря применению вариационных методов усвоения данных. Разработанный программный комплекс позволяет прогнозировать распространение загрязняющих веществ в прибрежной системе, некоторые из них, например биогенные вещества, являются питательной средой и способствуют развитию опасных микроводорослей. Данный прогноз позволяет вырабатывать стратегии по управлению устойчивым развитием природной системы.

Список литературы / References

1. Penenko AV, Khassenova ZT, Penenko VV, Pyanova EA. Numerical Study of a Direct Variational Data Assimilation Algorithm in Almaty City Conditions. *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2019;7(1):53–64 https://doi.org/10.32523/2306-6172-2019-7-1-53-64

2. Кулешов А.А., Смирнов И.Н., Танажура К.А.С., Беляев К.П. Сравнение методов усвоения данных в гидродинамических моделях циркуляции океана. *Математическое моделирование*. 2018;30(12):39–54. https://doi.org/10.31857/S023408790001935-2

Kuleshov A, Smirnov I, Tanajura K, Belyaev K. Comparison of Data Assimilation Methods into Hydrodynamic Models of Ocean Circulation. *Matematicheskoe modelirovanie.* 2018;30(12):39–54. https://doi.org/10.31857/S023408790001935-2 (In Russ.)

3. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. Доклад лауреата Большой золотой медали Российской академии наук имени М.В. Ломоносова 2004 года академика Г.И. Марчука. *Вестник Российской академии наук*. 2005;75(10):911–916.

Marchuk GI. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Report by Academician G.I. Marchuk, Laureate of the 2004 Lomonosov Grand Gold Medal of the Russian Academy of Sciences. *Herald of the Russian Academy of Sciences.* 2005;75(10):911–916. (In Russ.)

4. Марчук Г.И. *Избранные труды.* Т. 2. Москва: Российская академия наук; 2018. 500 с.

Marchuk GI. *Selected Works.* Vol. 2. Moscow: Russian Academy of Sciences; 2018. 500 p. (In Russ.)

5. Кагермазов А.Х. *Цифровая атмосфера. Современные методы и методология исследования опасных метеорологических процессов и явлений*. Нальчик: Печатный двор; 2015. 214 с.

Kagermazov AKh. *Digital Atmosphere. Modern Methods and Methodology for the Study of Hazardous Meteorological Processes and Phenomena.* Nalchik: Pechatnyi dvor. 2015. 214 p. (In Russ.)

6. Shutyaev V, Zalesny V, Agoshkov V, Parmuzin E, Zakharova N. Four-Dimensional Variational Data Assimilation and Sensitivity of Ocean Model State Variables to Observation Errors. *Journal of Marine Science and Engineering*. 2023;11(6):1253. https://doi.org/10.3390/jmse11061253

7. Кауркин М.Н., Ибраев Р.А., Беляев К.П. Усвоение данных наблюдений в модели динамики океана высокого пространственного разрешения с применением методов параллельного программирования. *Метеорология и гидрология.* 2016;7:49–59. URL: https://rucont.ru/efd/607637 (дата обращения: 22.05.2024).

Kaurkin MN, Ibrayev RA, Belyaev KP. Assimilation of Observational Data in the High-Resolution Ocean Dynamics Model Using the Parallel Programming Methods. *Meteorologiya i Gidrologiya.* 2016;7:49–59. URL: https://rucont.ru/efd/607637 (accessed: 22.05.2024). (In Russ.)

8. Пармузин Е.И., Шутяев В.П. Чувствительность функционалов от решения задачи вариационного усвоения к входным данным о потоке тепла для модели термодинамики моря. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2023;63(4):657–666. https://doi.org/10.31857/S0044466923040130

Parmuzin EI, Shutyaev VP. Sensitivity of Functionals of the Solution to the Variational Assimilation Problem to the Input Data on the Heat Flux for a Model of Sea Thermodynamics. *Žurnal vyčislitel'noj matematiki i matematičeskoj fiziki*. 2023;63(4):657–666. https://doi.org/10.31857/S0044466923040130 (In Russ.)

9. Марчук Г.И., Шутяев В.П. Сопряженные уравнения и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. *Труды института математики и механики УРО РАН.* 2011;17(2):136–150. https://doi.org/10.1134/S0081543812020113

Marchuk GI, Shutyaev VP. Adjoint Equations and Iterative Algorithms in Problems of Variational Data Assimilation. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*. 2011;17(2):136–150. https://doi.org/10.1134/S0081543812020113 (In Russ.)

10. Белова Ю.В., Рахимбаева Е.О., Литвинов В.Н., Чистяков А.Е., Никитина А.В., Атаян А.М. Изучение качественных закономерностей процесса эвтрофирования мелководного водоема на основе математической модели биологической кинетики. *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: математическое моделирование и программирование.* 2023;16(2):14–27. https://doi.org/10.14529/mmp230202

Belova YuV, Rahimbaeva EO, Litvinov VN, Chistyakov AE, Nikitina AV, Atayan AM. The Qualitative Regularities of the Eutrophication Process of a Shallow Water Research Based on a Biological Kinetics Mathematical Model. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software.* 2023;16(2):14–27. https://doi.org/10.14529/mmp230202 (In Russ.)

11. Никитина А.В., Сухинов А.И., Угольницкий Г.А., Усов А.Б., Чистяков А.Е., Пучкин М.В. и др. Оптимальное управление устойчивым развитием при биологической реабилитации Азовского моря. *Математическое моделирование*. 2016;28(7):96–106.

Nikitina AV, Sukhinov AI, Ugolnitsky GA, Usov AB, Chistyakov AE, Puchkin MV, et al. Optimal Control of Sustainable Development in Biological Rehabilitation of the Azov Sea. *Matematicheskoe modelirovanie*. 2016;28(7):96–106. (In Russ.)

12. Sukhinov A, Chistyakov A, Kuznetsova I, Belova Y, Rahimbaeva E. Solving Hydrodynamic Problems Based on a Modified Upwind Leapfrog Scheme in Areas with Complex Geometry. *Mathematics*. 2022;10(18):3248. https://doi.org/10.3390/math10183248

Об авторах:

Юлия Валериевна Белова, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и информатики Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), SPIN-код: 6008-2235, ORCID, ResearcherID, ScopusID, yvbelova@yandex.ru

Алла Валерьевна Никитина, доктор технических наук, профессор кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), SPIN-код: 4320-8190, ORCID, ResearcherID, nikitina.vm@gmail.com

Заявленный вклад авторов:

Ю.В. Белова: разработка программного модуля, проведение прогностического расчета движения загрязняющих веществ, оформление научной статьи.

А.В. Никитина: описание теоретической части исследования распространения загрязняющих веществ с применением вариационных методов усвоения данных наблюдений.

Конфликт интересов: **авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.**

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the Authors:

Yuliya V. Belova, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Mathematics and Computer Science, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation, SPIN-code: 6008-2235, ORCID, ResearcherID, ScopusID, yvbelova@yandex.ru

Alla V. Nikitina, Dr. Sci. (Eng.), Professor of the Department of Computer Engineering and Automated Systems Software, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), SPIN-code: 4320-8190, ORCID, ResearcherID, nikitina.vm@gmail.com

Claimed Contributorship:

YuV Belova: development of a software module, predictive calculation of the movement of pollutants, design of a scientific article.

AV Nikitina: description of the theoretical part of studying the spread of pollutants using variational methods for assimilating observational data.

Conflict of Interest Statement: **the authors do not have any conflict of interest.**

All authors have read and approved the final manuscript

Поступила в редакцию / Received 27.05.2024
Поступила после рецензирования / Revised 19.06.2024
Принята к публикации / Accepted 26.06.2024